

предполагают творческий подход к ответу на поставленный вопрос. Студентам разрешается пользоваться своими конспектами лекций и методическими материалами, имеющимися в лаборатории; категорически не разрешается общаться студентам друг с другом. Цель выполнения контрольной работы, которую ставит преподаватель перед студентом – разобраться и понять предлагаемый материал курса.

Тестирование – завершающая часть рубежного мониторинга. Тесты составлены по всем разделам курса. На каждый вопрос есть четыре ответа, один из которых правильный. Студент должен не только выбрать правильный ответ, но и обосновать его.

Тестирование проводится один на один – преподаватель и студент, кроме них в аудитории никого нет. Это исключает подсказки, пользование шпаргалками, а также позволяет выявить, насколько глубоко студент усвоил материал и в какой мере развито аналитическое мышление учащегося.

Следует отметить, что вопросы в карточках письменной контрольной работы и в тестировании регулярно обновляются и корректируются.

Применение балльно-рейтинговой системы оценки знаний студентов по контрольным точкам позволяет преподавателю более обоснованно выставить итоговую экзаменационную оценку, которая, как правило (по опыту проведения занятий в течение последних нескольких лет) принимается студентом без каких-либо возражений.

Митрохин Ю.С., Мельчуков С.А., Шудегов В.Е.

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ
КЛАСТЕРОВ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ И ОБРАЗОВАНИИ**

yuri.mitrokhin@gmail.com

Удмуртский государственный университет (УдГУ)

г. Ижевск

Современные методы из первых принципов (ab initio) применяются для моделирования физико-механических свойств твердых тел и жидкостей на многопроцессорных параллельных кластерах. При этом используются самые совершенные и эффективные программные комплексы, как платные, так и бесплатные. Эти методы используются также и в учебном процессе, что позволяет готовить специалистов на современном международном уровне.

The first-principles (ab initio) methods are used for simulation the physical – mechanical properties of solids and liquids on multi-processor parallel clusters. The modern and efficient packages, free and commercial, are used. They are used also in the education and it is possible prepare the specialists on the modern international level.

Методы моделирования в физике, химии и в других областях знаний требуют очень больших вычислительных затрат и предъявляют жесткие требования к имеющейся у исследователя вычислительной технике. Раньше такие работы можно было выполнить только на крупных вычислительных

центрах, которые не были доступны широкому кругу исследователей. С появлением персональных компьютеров (ПК) и ростом их мощности стало возможным выполнение таких работ в НИИ, вузах и даже на домашних ПК. По этой причине закрепился термин "бытовой компьютер". Одновременно с этим появилось много различного программного обеспечения которое становилось все более и более доступным. После массового распространения сети Интернет в этой области произошла настоящая революция. Появилось огромное количество хорошо отлаженных программ, многие из которых были бесплатными, а коммерческие программы имели доступные для многих организаций цены.

Наиболее популярными методами моделирования в физике и химии были методы молекулярной динамики (MD) и Монте Карло (MC). Однако там основной проблемой была проблема выбора потенциала межатомного взаимодействия. От этого во многом зависели результаты моделирования. После появления в 1985 году пионерской работы Car [1] Parinello, где авторы предложили новый метод моделирования, получивший название метода первопринципной (*ab initio*) молекулярной динамики (CPMD), наблюдается резкое увеличение публикаций с использованием этого метода. В этом методе решается задача расчета распределения электронной плотности в изучаемой системе с помощью квантово-механических методов (уравнения Кона-Шема [2]), затем силы межатомного взаимодействия находятся по теореме Геллмана-Фейнмана путем дифференцирования электронной плотности. Очевидно, что вычислительные затраты в этом случае возрастают на 2-3 порядка и такая задача уже не может быть решена на обычном бытовом компьютере. До недавнего времени эти задачи решались на мощных суперкомпьютерах типа CRAY T3E. Но даже и этом случае число атомов в моделируемой системе не превышало 100.

Бурное развитие развитие вычислительной техники привело к тому, что в настоящее время появились многопроцессорные кластеры на базе процессоров Intel и AMD, которые стали доступными для многих организаций. В УдГУ уже 7 лет работает 12-процессорный кластер PARK на основе ПК Pentium 3 в учебно-научной лаборатории параллельных вычислений. С 2005 года в ИМЕТ в лаборатории матмоделирования работает кластер на базе Opteron и Athlon-64. Появление нового поколения 64 – разрядных ПК снимает ограничения на объем оперативной памяти и увеличивает производительность вычислительной установки в 10 и более раз. С 2007 года в УдГУ появились 4-х ядерные 64-разрядные компьютеры в различных подразделениях университета. Они все объединены в сеть с использованием Грид-технологий. Наш опыт работы говорит о том, что наличие большой оперативной памяти и внешней памяти на дисках является необходимым условием для успешной работы при проведении численных экспериментов.

В учебно-научной лаборатории параллельных вычислений в УдГУ были выполнены работы по моделированию жидких металлов (Cu, Ni, Cs) и их сплавов (Ni_3Al), а также численные эксперименты по моделированию

физико-механических свойств металлов и сплавов. Например, типичное время моделирования одного варианта процесса плавления металла на 8 процессорах кластера PARK составляло около 15-20 дней, а максимальная производительность достигалась на 6 – 8 процессорах. Здесь следует сказать, что в этих расчетах использовался один из самых эффективных пакетов первопринципного моделирования – Венский пакет VASP [3]. Это коммерческий пакет, его стоимость в настоящее время составляет 3000 \$. На 2-процессорном Opteron'e эта работа может быть выполнена за 2-3 дня. На 4-х ядерном компьютере Intel Core2 Quad – за 1 день. Интересно отметить, что стоимость такого Opteron'a в 3 раза меньше, кластера PARK, а стоимость 4-х ядерного компьютера в 3 раза меньше стоимости Opteron'a. Этот факт хорошо известен в виде, так называемого, закона Мура. Он гласит, что производительность компьютеров удваивается каждые полтора года, и их стоимость снижается.

Многие ведущие вузы страны в настоящее время имеют многопроцессорные вычислительные кластеры, что позволяет выполнять сложные научные расчеты. Однако, наличие только одного “железа” не решает проблему. Она состоит в том, то для успешного выполнения указанных выше работ нужно специальное и довольно сложное матобеспечение, а также нужны специалисты обладающие необходимой квалификацией. Оказалось, что эту проблему решить гораздо труднее, чем покупка дорогого “железа”. Таких специалистов нужно готовить по специальным программам и с широким использованием практических методов работы на параллельных вычислительных комплексах. В УдГУ выполнено несколько дипломных работ по молекулярной динамике, квантовой химии и параллельному программированию. Наш научный и педагогический опыт работы в этой области знаний говорит, что только непосредственное участие студентов в научных работах вместе с руководителем позволяет подготовить специалистов высокого класса, способных дальше к самостоятельной научной работе. Если же преподаватель, не участвует в научной работе, то он не сможет научить этому и студентов. Следует заметить, что и студенты хорошо это понимают.

Важным этапом в этом направлении является открытие в УдГУ факультета Новых Информационных Технологий в 2006 году. Это позволит нашему университету занять достойное место среди ведущих вузов страны в подготовке специалистов современного уровня. Сотрудничество с ведущими институтами Академии наук, к коим принадлежит Институт металлургии им. А.А.Байкова, позволяет выполнять научные исследования на максимально высоком уровне. Кроме того эти исследования представляют интерес и с прикладной точки зрения. УдГУ также сотрудничает и с другими академическими институтами, с Ижевским Физико Техническим институтом и институтом Физики металлов УрО РАН в г. Екатеринбурге (ИФМ). Например в УдГУ совместно с ИФМ были выполнены работы по моделированию сплавов Ni_3Al-X ($X = Co, Nb$) для авиа – космической промышленности.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. R.Car, M.Parinello, Phys. Rev. Let., 55, 2471 (1985).
2. W.Kohn, L.J.Sham, Phys. Rev. 140, A1133 (1965).
3. G.Kresse, J.Futhmuller, Comp. Mat. Sci., 6, 15 (1996).

Митюшова Л.Л.

ОПЫТ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ РЕСУРСОВ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

Ludamit@mail.ru

ГОУ ВПО "УГТУ-УПИ имени первого Президента России

Б.Н.Ельцина"

г. Екатеринбург

В докладе анализируется опыт использования электронных ресурсов, активно создаваемых в университете в последние годы. Проводится классификация электронных ресурсов по способу их внедрения в учебный процесс, а также технологические условия работы с электронными ресурсами.

In the report the experience of using electronic resources is analysed which are lately actively created in the University. The electronic resources are classified by the method of their introduction in the process of education as well as the technological services of work with the electronic resources.

Реорганизация учебного процесса, идущая в отечественных учебных заведениях преследует несколько целей. Одна из них – полная или частичная замена преподавателя, так называемыми электронными ресурсами. В настоящее время усилия направлены:

- на унификацию и компьютеризацию информационного потока, идущего от преподавателя к студенту;
- на осуществление безличностного контроля знаний, полученных студентами;
- сбор и обработка оперативных статистических данных учебного процесса.

При создании электронных ресурсов первых двух направлений активно используются рядовые преподаватели. Более того, без широкого привлечения преподавательского состава к созданию соответствующих электронных ресурсов, этот процесс был бы невозможен. В нашем университете была найдена удачная форма привлечения преподавателей к этой работе. Люди, занимающиеся её организацией, тонко чувствовали не только сложности самой работы, но проблемы общения в преподавательском коллективе. В результате, за два года появился огромный электронный ресурс вуза и возможность реально использовать его в учебном процессе.

Привлечение преподавателей к компьютеризации учебного процесса, привело не только к созданию электронных курсов, но и к их использованию.